

PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE ESTRUTURAS SEMICONDUTORAS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE

*ANTONIO NEWTON BORGES **

*FRANCISCO AP. PINTO OSÓRIO **

OBJETIVOS

Estudos das propriedades de elétrons confinados em heteroestruturas semicondutoras de dimensionalidade reduzida como poços quânticos, heterojunções, fios quânticos e pontos quânticos compostos principalmente de GaAs-AlGaAs. Uma especial atenção é dada para os efeitos de muitos corpos, como, por exemplo, o cálculo da energia das excitações coletivas de um gás de elétrons confinados em fios quânticos. Também estamos interessados no cálculo das energias de ligação e da energia de transição entre os níveis de uma impureza doadora confinada nestes sistemas, considerando os efeitos do acoplamento elétron-fonon longitudinal óptico e interfacial óptico, bem como o efeito de campos elétricos e magnéticos sobre os estados eletrônicos. Temos também estudado a estrutura eletrônica de heteroestruturas semicondutoras não dopadas, com dopagem modulada e com dopagem tipo delta sob a ação de campos elétricos e magnéticos externos. Nesses sistemas estamos principalmente interessados em suas propriedades ópticas e no tunelamento ressonante de elétrons e buracos em poços quânticos duplos.

* Professores do Departamento de Matemática e Física da UCG.

INTRODUÇÃO

Modernas técnicas de crescimento de cristais, tais como Epitaxia por Feixe Molecular (MBE) e Deposição de Vapor Organometálico (MOCVD), têm tornado possível a fabricação de estruturas compostas de camadas alternadas de dois, ou mais materiais semicondutores, com alta qualidade e com grande controle sobre a espessura das camadas e interfaces abruptas entre os materiais. A proposta pioneira para este tipo de fabricação partiu de Esaki e Tsu (1) no ano de 1970, e gerou até os dias de hoje um grande número de trabalhos experimentais e teóricos, com o objetivo de entender a natureza dos estados eletrônicos associados com essas novas heteroestruturas.

As estruturas semicondutoras mais comumente estudadas do ponto de vista experimental e teórico são compostas de materiais dos grupos III-V e II-VI da tabela periódica. Dentre essas, as mais intensamente estudadas são as heteroestruturas compostas de camadas alternadas de GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, devido ao excepcional casamento das constantes de rede dos dois materiais, que permite a obtenção de interfaces abruptas e sem rugosidades. Além do mais, ambos os semicondutores são de gap direto, sendo que a energia de gap do AlGaAs é maior que a do GaAs. Este fato provoca uma descontinuidade da banda de condução, que é igual à diferença entre as afinidades eletrônicas dos dois semicondutores. Essa descontinuidade do extremo da banda em heterointerfaces obviamente comanda todas as propriedades eletrônicas das estruturas. Particularmente, se em uma heterojunção de AlGaAs-GaAs o material da barreira (AlGaAs) é dopado com impurezas doadoras, enquanto o GaAs é mantido puro, os elétrons fornecidos pelas impurezas irão se alojar no material de gap menor (o GaAs), ficando confinados por um poço de potencial unidimensional próximos à interface entre os materiais. Este poço de potencial é originado pela diferença de gap entre os dois materiais e pelas impurezas doadoras no AlGaAs. A presença desse potencial quantiza o movimento eletrônico na direção normal à interface em sub-bandas, que são dinamicamente

bidimensionais (2D), desde que os elétrons são praticamente livres para se moverem no plano paralelo à interface, mas possuem seu movimento quantizado na direção normal a interface. Pelo mesmo processo de dopagem modulada, podemos ter a presença do gás de elétrons quase-bidimensional em poços quânticos isolados e super-redes, que são compostas pela superposição de heterojunções. Essas estruturas bidimensionais são caracterizadas por intrigantes fenômenos nunca antes observados no volume (bulk) dos semicondutores. Um exemplo importante é que essas estruturas exibem altas mobilidades, devido a separação espacial entre os elétrons e as impurezas doadoras, diminuindo assim o espalhamento elástico. Além disso, a presença de impurezas ionizadas é muito beneficiada pelo confinamento espacial que aumenta em muito a interação coulombiana, originando energias de ligação mais altas que as encontradas no bulk.

Outros compostos semicondutores importantes são aqueles conhecidos como materiais semicondutores semimagnéticos ou semicondutores magnéticos diluídos. Esses materiais são obtidos a partir dos elementos dos grupos II-VI da tabela periódica, com a inclusão de um elemento com propriedades magnéticas, isto é, com as camadas d ou f apenas parcialmente preenchidas. Como exemplo de tais semicondutores, podemos citar o CdMnTe e o HgMnTe. A principal diferença desses materiais em relação aos materiais não magnéticos é revelada quando um campo magnético externo é aplicado. Nesse caso, a presença dos íons magnéticos modifica o comportamento dos portadores livres devido à interação de troca entre os momentos magnéticos localizados e os elétrons de Bloch. Em uma primeira aproximação, o efeito dos íons magnéticos sobre os portadores pode ser descrito através da introdução de uma média de spin $\langle S_z \rangle$ proporcional à magnetização do bulk. Desta forma, os íons magnéticos desempenham o papel de um amplificador do campo magnético externo, onde o fator de amplificação, o fator giromagnético, é da ordem de 300. Este fenômeno torna possível observar efeitos magnéticos extremamente grandes, mesmo para campos magnéticos externos moderados, como, por exemplo, “splitting Zeeman” gigante.

Outra característica importante dos materiais dos grupos II-V e II-VI é que eles são fracamente polares. Desta forma, o movimento eletrônico em tais semicondutores é acompanhado pelo campo de polarização dos fonons longitudinais-ópticos (LO) formando a quase partícula chamada de polaron(2). Os efeitos desse acoplamento (efeitos polarônicos) se manifestam diminuindo a energia do elétron por uma quantidade correspondente à energia de ligação do polaron e aumentando sua massa efetiva. Tal renormalização da massa efetiva pode ser observada claramente em experimentos de Ressonância Ciclotrônica, onde tradicionalmente mede-se a energia de transição entre os níveis $n = 0$ e $n = 1$ de Landau, em função do campo magnético aplicado à amostra.

Nos anos mais recentes, impulsionados pelo avanço tecnológico, novas heteroestruturas capazes de conter um gás de elétrons quase-unidimensional (Q1D) ou quase-zero-dimensional (QZD) têm sido fabricadas com muito sucesso e frequência. Essas heteroestruturas são comumente fabricadas a partir de heterojunções e são chamadas de fios quânticos (Q1D) e pontos quânticos (QZD). Nestas estruturas com dimensões ainda mais reduzidas surgem novos e interessantes fenômenos físicos. Dessa forma, o apelo tecnológico é grandioso e tem atraído grandes investimentos para as pesquisas, principalmente nos países preocupados com o futuro controle das tecnologias de ponta.

Os temas estudados pelo nosso grupo em colaboração com os professores da Universidade Federal de Goiás, Márcio Adriano Rodrigues Souza, Moacir Mendonça e Paulo César Miranda Machado e com o Prof. José Roberto Leite do Instituto de Física da Universidade de São Paulo são os seguintes:

1. Efeitos de muitos corpos, como correlação e troca sobre as excitações coletivas de plasmons. Efeito de blindagem da interação elétron-elétron e elétron-fonons^{4,5}.

2. Efeitos do acoplamento elétron-fonon longitudinais ópticos sobre a massa efetiva de elétrons confinados em heterojunções

e fios quânticos semicondutores, como função do campo magnético aplicado⁶⁻¹¹.

3. Estudo dos efeitos da interface na energia dos níveis de Landau em heterojunções e poços quânticos^{12,17}.

4. Cálculo da energia de transição entre os níveis de impurezas doadoras localizadas em pontos e poços quânticos.

5. Cálculo da energia de ligação de impurezas raras¹³⁻¹⁶.

6. Efeitos da não parabolicidade das bandas de condução e das bandas de valência¹⁴⁻¹⁶.

7. Efeitos dos campos elétrico e magnético externos aplicados às heteroestruturas¹³⁻¹⁶.

8. Tunelamento ressonante em poços duplos, sob a ação de campos elétricos e magnéticos longitudinais e transversais.

9. Propriedades eletrônicas de sistemas com dopagem modulada, e dopagem delta.

10. Cálculo das propriedades eletrônicas dos materiais semicondutores semimagnéticos, principalmente do tunelamento ressonante em poços duplos e da transição tipo I - tipo II em CdTe/CdMnTe.

TRABALHOS EM ANDAMENTO

A seguir apresentamos um breve relato dos trabalhos de pesquisa submetidos para publicação e em andamento no biênio 96/97:

3.1 Efeitos de correlação, Troca e subbandas sobre as excitações coletivas em fios quânticos parabólicos.

A. N. Borges, Salviano A. Leão e O. Hipólito

As excitações de plasmons em fios quânticos quase-unide-

mensionais com confinamento parabólico, são calculadas dentro do modelo de duas e três subbandas usando a teoria auto-consistente proposta por Singwi, Tosi, Land e Sjölander (STLS)³ para obtenção da função resposta do sistema eletrônico. Os fatores de forma desenvolvidos, incluem corretamente a espessura da camada eletrônica. Calculamos as energias das excitações, fator de estrutura e função de correlação de pares em função da densidade eletrônica e da diferença de energias entre as subbandas. Encontramos que os efeitos de correlação são significantes e não podem ser desprezados.

Artigo publicado no *Physical Review B* 55, 7, 4680 (1997).

3.2 Efeitos da altura das barreiras de potenciais sobre plasmons inter e intra-subbanda.

P. C. M. Machado, F. A. P. Osório e A. N. Borges

Empregamos a teoria RPA (aproximação das fases aleatórias) para estudarmos teoricamente as excitações coletivas de um gás de elétrons confinado em um fio quântico retangular de GaAs-AlGaAs. Variamos as alturas das barreiras de potencial e calculamos as grandezas físicas de interesse como a energia das excitações coletivas inter e intra- subbandas. Estudamos o comportamento do fator de forma quase-unidimensional e verificamos a importância de se considerar as alturas do poço de confinamento como finitas.

Artigo aceito para publicações no *Modern Physics Letter B* (1997), Word Scientific

3.3 Excitações Coletivas em fios quânticos de GaAs-Al_x

Ga_{1-x}As.

P.C.M. Machado, J.R. Leite F.A.P. Osório e A.N. Borges

Neste trabalho estudamos teoricamente os efeitos da altura das barreiras de potenciais sobre as excitações coletivas de um gás de elétrons confinado em um fio quântico retangular de GaAs-AlGaAs, usando a teoria auto-consistente proposta por Singwi, Tosi, Land e Sjölander (STLS). Nós calculamos para várias alturas das barreiras de potencial o potencial efetivo, energia de plasmons, fator de estrutura e a função de correlação dos pares. Nós comparamos nossos resultados com aqueles obtidos com a teoria RPA e expressivas diferenças foram encontradas, sendo que a teoria RPA leva a um incorreto resultado para a função de correlação dos pares. Nós observamos que as transições inter-subbandas são mais sensíveis às variações das alturas das barreiras de potencial.

Artigo submetido ao *Physical Review B* (1997), By 5829.

3.4 Solução da equação de Schrödinger independente do tempo para um poço de potencial quadrado assimétrico.

P.C.M. Machado, F.A.P. Osório e A.N. Borges

Utilizando um tema muito comum na Mecânica Quântica, chegamos a um resultado muito interessante que não é usualmente abordado na literatura tradicional. Trata-se do cálculo dos autovalores da energia do elétron em poços de potenciais quadrados assimétricos. Mostramos que os autovalores da energia do elétron em poços de potenciais finitos assimétricos, podem ser obtidos a partir das soluções de primeira e segunda classes dos poços de potenciais finitos simétricos, que são encontradas nos livros de Mecânica Quântica.

Artigo aceito para publicação na *Revista de Ensino de Física* (1997), SBF.

3.5 Polarizabilidade de uma impureza doadora em fio quântico semiconductor.

F.A.P. Osório, A.N. Borges, A.A. Caparica e J.R. Leite

Calculamos a polarizabilidade e a energia de ligação de uma impureza doadora localizada no interior de um fio quântico retangular de GaAs-AlGaAs com alturas de potencial finitas, usando o método variacional. Supomos que o fio está sob a ação de um campo elétrico aplicado na direção perpendicular ao comprimento do fio, fazendo um ângulo θ com a direção x . Observamos que a polarizabilidade e a energia de ligação são fortemente influenciadas pela forma geométrica do fio. A polarizabilidade é estudada para vários ângulos de incidência θ e para fios de variadas dimensões.

Artigo aceito para publicação no *Solid State Communications* (1997), Pergamon Press.

3.6 Efeitos da interação elétron-fonon sobre transições intra-doadores em poços quânticos dopados de GaAs-AlGaAs

F.A.P. Osório, M.Z. Maialle e O. Hipólito

Calculamos as energias de transição de um magnetopolaron entre os níveis $1s \rightarrow 2p+$ de uma impureza doadora localizada dentro de um poço quântico de GaAs-AlGaAs na presença de um campo magnético externo aplicado à amostra. Nossos resultados teóricos concordam bem com os resultados experimentais e mostramos que não há participação de fonons interfaciais no processo observado experimentalmente.

Artigo submetido ao *Physical Review B* (1997), BV5924

3.7 Níveis de energia de um doador em um fio quântico cilíndrico sob a ação de campos magnéticos fracos.

M. Mendonça, A.N. Borges e F.A.P. Osório

Calculamos os níveis de energia de uma impureza doadora hidrogenóide em um fio quântico cilíndrico de GaAs, na presença de um campo magnético aplicado, usando um método variacional aliado

a algumas aproximações. Testamos as soluções em comparação com resultados obtidos por outros métodos.

Em Andamento (1997).

3.8 Tunelamento ressonante usado como uma prova óptica da estrutura eletrônica de poços quânticos.

M.A.R. Souza, A.N. Borges e V.A. Chitta

Investigamos a influência dos campos elétricos e magnéticos cruzados sobre o tunelamento ressonante de elétrons e buracos gerados opticamente em um sistema formado por dois poços quânticos assimétricos de GaAs-AlGaAs. Para calcular a estrutura eletrônica desse sistema nós desenvolvemos uma técnica numérica que tem por base o método da diferença-finita e o método da potência inversa. A relação de dispersão foi então obtida para diferentes valores de campos elétricos e magnéticos usando o modelo $k \cdot \vec{P}$ (8 x 8) dentro do formalismo da função envelope. Para determinados campos elétricos aplicados obtivemos o campo magnético necessário para termos o tunelamento ressonante de elétrons ou buracos entre os poços. Conseqüentemente, verificamos que as curvas campo elétrico versus campo magnético obtidas desses resultados mapeiam a relação de dispersão de um poço quântico. É feita ainda uma comparação sistemática entre nossos resultados e resultados experimentais recentes.

Em Andamento (1997)

3.9 Tunelamento ressonante de elétrons e buracos em poços quânticos duplos assimétricos de CdTe/CdMnTe.

M.A.R. Souza, A.N. Borges e V.A. Chitta

Estamos investigando o efeito de um campo magnético aplicado na direção de crescimento sobre o tunelamento ressonante de elétrons e buracos em um sistema formado por dois poços quânticos

assimétricos de CdTe separados por uma barreira de potencial de Cd-MnTe. Nesse sistema, a barreira de potencial é fortemente influenciada pelo campo magnético externo, modificando de forma significativa o tunelamento dos portadores. A estrutura eletrônica é calculada para diferentes valores de campos magnéticos usando o modelo $k \cdot \vec{p}$ (8 x 8) dentro do formalismo da função envelope.

Em Andamento (1997).

REFERÊNCIAS

- [1] L. Esaki e R. Tsu, IBM Res. Note, RC-2418 (1969)
- [2] Polarons and excitons, Scottish University Summer (1962)
- [3] Singwi, Tosi, Land e Sjölander, Phys. Rev. 176, 589 (1968)
- [4] A.N. Borges, M.H. Degani e O. Hipólito, Supperl. and Microst., 13, 51, 1993.
- [5] A.N. Borges, O. Hipólito e V.B. Campos, Phys. Rev. B52, 1724, 1995.
- [6] F.A.P. Osório, M.H. Degani e O. Hipólito, Braz. Journ. of Phys, 24, 248, 1994.
- [7] F.A.P. Osório, M.H. Degani e O. Hipólito, Phys. Rev. B, 38, 8477, 1988.
- [8] S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. 52, 859, 1984.
- [9] M.A. Hopkins, R.J. Nicholas, e M.A. Brummel, Phys. Rev. B, 36, 4789, 1987.
- [10] W. Seidenbush, Phys. Rev. B 36, 1877, 1987.

- [11] L. Wendler, A.V. Chaplick, O. Hipólito, R. Haupt and F.A.P. Osório, MRS Symposium Proceedings, 283, 833, 1993.
- [12] F.A.P. Osório, M.Z. Maialle e O. Hipólito, Solid State Comm., 80, 567, 1991.
- [13] F.A.P. Osório, M.H. Degani e O. Hipólito, Phys. Rev. B, 37, 1402, 1988.
- [14] F.A.P. Osório, M.H. Degani e O. Hipólito, Phys. Rev. B, 52, 4662, 1995.
- [15] F.A.P. Osório, M.H. Degani e O. Hipólito, Superlatt. Microst. 6,111, 1989.
- [16] F.A.P. Osório, M.H. Degani e O. Hipólito, Superlatt. Microst.6,107, 1989.
- [17] D.L. Lin, R. Chen and T.F.George, Phys. Rev. B 43, 9382, 1991.